

СИНТЕЗ НОВЫХ БРАУНМИЛЛЕРИТОВ

$\text{LaBa}(\text{MIn})\text{O}_5$ ($\text{M}=\text{Zn}, \text{Ca}, \text{Mg}$)

Устинова В.О., Обрубова А.В., Корякин К.Е., Анимича И.Е.

Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Соединения со структурой браунмиллерита $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_5$ характеризуются наибольшим кислородным дефицитом среди известных перовситоподобных структур – 1/6 позиций кислорода вакантна. Это предполагает, с одной стороны, возможность быстрого кислородно-ионного транспорта, а с другой – присутствие координационно-ненасыщенных полиэдров может обеспечить возможность поглощения воды из газовой фазы и появление протонной проводимости. С целью получения новых материалов с комплексом практически важных свойств осуществляют модифицирование матричной структуры, например, при создании многоподрешеточных структур, в том числе, при введении в А- и В-подрешетки разноразмерных или разнозарядных катионов.

В данной работе предпринята попытка получить новые сложноокисидные фазы на основе структуры браунмиллерита состава $\text{LaBa}(\text{MIn})\text{O}_5$ ($\text{M}=\text{Zn}, \text{Ca}, \text{Mg}$) с помощью модифицированного метода Печини. Преимущества метода Печини состоят в том, что он обеспечивает хорошую однородность через смешение исходных компонентов на молекулярном уровне в растворе, позволяет контролировать стехиометрию синтезируемых образцов, а также не требует высокой температуры для реализации процесса.

Синтез осуществляли по глицин-нитратной технологии, глицин выступает в роли топлива и лиганда в реакциях комплексообразования. Исходные реагенты BaCO_3 , CaCO_3 , MgO , ZnO , La_2O_3 , In_2O_3 были растворены в избытке концентрированной азотной кислоте при нагревании. Далее, в полученных растворах нитратов растворяли при нагревании навески глицина $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}_2\text{N}$. Полученные растворы выпаривали в круглодонной выпарительной чашке на плитке при 200°C до тех пор, пока не происходило самовозгорание упаренных растворов. В процессе горения происходит формирование частиц сложного оксида. После перетирания полученных порошков они подвергались дополнительной термообработке.

Полученные образцы были аттестованы рентгенографически, установлено, что однофазные продукты образуются при температуре 1200°C . Термогравиметрический анализ показал, что полученные соединения способны к обратимой интеркаляции воды в области температур $250\text{--}300^\circ\text{C}$, проведены расчеты степеней гидратации.

Методом ИК спектроскопии подтверждено наличие ОН-групп в структуре сложных оксидов. В дальнейшем планируется изучение электрических свойств полученных соединений.

ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ, МЕЖФАЗНЫЙ ОБМЕН И ДИФФУЗИЮ КИСЛОРОДА КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ LSM—YSZ

Фарленков А.С.^(1,2), Ананьев М.В.^(1,2)

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН
620990, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Одним из перспективных направлений развития энергетики и энергосбережения является создание твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ). Для успешной эксплуатации в промышленных масштабах необходима стабильность компонентов и параметров ТОТЭ на протяжении как минимум 20 — 40 тыс. часов в рабочих условиях. Проблемы деградации функциональных материалов ТОТЭ на сегодняшний день сдерживают широкое коммерческое внедрение этих устройств. Целью работы является моделирование процесса огрубления микроструктуры катодных материалов LSM—YSZ ($\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{MnO}_3\text{—Zr}_{0.85}\text{Y}_{0.15}\text{O}_{1.975}$), приводящего к изменению их свойств при длительном, по сравнению с проведенным экспериментом, времени выдержки. Объектом исследования выбраны симметричные ячейки LSM—YSZ | YSZ | LSM—YSZ производства Riso (Дания).

Ранее нами [1] были показаны количественные взаимосвязи параметров микроструктуры (доля пор, фаз в составе композитов, функции распределения размеров пор и частиц твердых фаз, протяженность межфазных и трехфазных границ, факторы извилистости) с физико-химическими свойствами (скорость межфазного обмена, коэффициент диффузии кислорода, поляризационное сопротивление) функциональных материалов ТОТЭ. Используя полученные зависимости, методом клеточного автомата проведено моделирование процесса огрубления микроструктуры катодных композиционных материалов LSM—YSZ. Предложена физическая модель, описывающая поведение во времени скорости межфазного обмена, коэффициента диффузии кислорода и поляризационного сопротивления за счет огрубления микроструктуры исследуемых симметричных ячеек. Данная модель основана на решении диффузионной задачи с набором физико-химических параметров, не